

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ДОНСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра «Физическое и прикладное материаловедение»

**Методические указания
и варианты заданий для выполнения
контрольной работы
по дисциплине «Моделирование и оптимизация свойств
материалов и процессов»
для студентов бакалавров заочной формы обучения
(направление подготовки 22.03.01- Материаловедение и технология
материалов)**

Ростов-на-Дону
2021

Составитель: Щербакова Е.Е.

Программа и варианты контрольной работы для студентов - бакалавров четвертого курса заочного формы обучения направления 22.03.01 – Материаловедение и технология материалов: Методические указания / ДГТУ. Ростов н/Д: Издательский центр ДГТУ, 2021. – с.

Методическая разработка предназначена для студентов-бакалавров заочной формы обучения. Содержит программу курса. Указана рекомендуемая литература, варианты контрольной работы (седьмой семестр), а также даны образцы решения задач. **Номер варианта студент определяет по последней цифре зачетной книжки.**

Рецензенты: д.т.н., проф. Домбровский Ю.М. (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону)

Научный редактор: д.т.н., доц. Князев С.Ю.

© Издательский центр ДГТУ, 2021

Введение

Целью освоения дисциплины «Моделирование и оптимизация свойств материалов и процессов» является фундаментальная подготовка специалистов по материаловедению и технологии материалов в области организации и проведения научных исследований и практической реализации возможностей математического моделирования и вычислительного эксперимента. А также, для повышения эффективности инженерных разработок при создании принципиально новых и совершенствования существующих материалов и технических устройств на их основе.

Изучение дисциплины позволит студентам овладеть необходимыми знаниями и умениями в области моделирования, прогнозирования и оптимизации свойств материалов, проектирования технологических процессов. Эти знания являются основой профессиональной деятельности специалиста в различных сферах: научно-исследовательской; расчетно-аналитической; производственной; проектно-технологической и организационно-управленческой.

Материал этой дисциплины базируется на фундаменте тех знаний, навыков, умений и компетенций, которые студенты получили ранее при изучении предметов естественнонаучного блока: математики, физики, информатики и информационно-коммуникационных технологий и предметов обще-профессионального блока: механических и физических свойств материалов, теории диффузионных процессов, теории и технологии термической и химико-термической обработки изделий.

В профессиональной деятельности инженера особую важность имеет процедура математической обработки результатов эксперимента, понимание случайного характера измеряемой величины, вклад влияния различных факторов на измерение. С целью напоминания указанных тем из курса Математики студентам предлагаются как методическая поддержка два пособия «Конспект лекций по Математической статистике» и «Конспект лекций по Математической обработке результатов эксперимента».

Методическое пособие «Конспект лекций по Моделированию и оптимизации» отражает основные вопросы изучаемой дисциплины.

Настоящие Методические указания являются практическим руководством для изучения дисциплины «Моделирование и оптимизация свойств материалов и процессов» студентами IV курса заочной формы обучения направления подготовки 22.03.01- Материаловедение и технология материалов. Указания содержат программу курса по разделам.

По разделам даны задания из 10 вариантов к каждой теме. Приведены примеры решения задач. По всему курсу представлена литература.

Номер варианта студент определяет по последней цифре зачетной книжки.

Программа курса

Раздел 1. Виды и уровни моделирования	Введение. Общие сведения о математическом моделировании. Основные понятия и задачи моделирования. Виды и уровни моделирования.
Раздел 2. Физическое моделирование объектов.	Физическое моделирование объектов: масштабное, аналоговое, натурное. Физико-математические критерии подобия.
Раздел 3. Математическое моделирование объектов	Математическое моделирование объектов: понятие, определение, требование к модели, структура модели, классификация математических моделей. Цели математического моделирования для технических объектов и технологических процессов.
Раздел 4. Алгоритм построения модели	Алгоритм построения аналитической (теоретической) модели. Алгоритм построения эмпирической (формально-статистической) модели. Краткая характеристика основных этапов алгоритмов построения моделей.
Раздел 5. Математическая обработка результатов экспериментов	Основы теории погрешности измерения. Массив экспериментальных результатов. Генеральная совокупность. Выборка, выборочный метод. Основные числовые характеристики статистической выборки и выборочного распределения случайной величины. Первичная математическая обработка экспериментальных данных (абсолютная и относительная погрешность оценки истинного значения, критерий Стьюдента, критерий Смирнова, критерий Фишера). Приемы и методы вторичной математической обработки экспериментальных данных. Интерполяция (методы Лагранжа, Ньютона, сплайнов). Экстраполяция. Аппроксимация, критерий аппроксимации, метод наименьших квадратов (МНК), метод неопределенных коэффициентов. Спектральный анализ. Основные виды статистического анализа экспериментальных данных: корреляционный анализ, дисперсионный анализ, регрессионный анализ.
Раздел 6. Планирование и проведение эксперимента	Определение фактора, уровня фактора. Требования к фактору и к совокупности факторов. Выбор уровней факторов. Выбор модели - вида функции отклика. Матрица планирования эксперимента. Полный факторный эксперимент и математическая модель. Учет эффекта факторного взаимодействия. Дробный факторный эксперимент. Проведение эксперимента. Ошибки параллельных опытов, проверка однородности дисперсий.

Раздел 7. Эмпирические регрессионные модели однофакторные и многофакторные	Определение коэффициентов регрессии на основе МНК, адекватность и точность регрессионных моделей. Виды регрессионных моделей. Матричный подход к определению коэффициентов регрессии многофакторной модели. Оценка адекватности и точности многофакторной модели.
Раздел 8. Теоретические функциональные модели на основе дифференциальных, алгебраических и трансцендентных уравнений и систем	Уравнения математической физики и фундаментальные физические законы сохранения. Уравнение теплопроводности, уравнение диффузии, уравнение состояния, уравнение неразрывности. Начальные и граничные условия при построении теоретической модели. Основные методы решения задач. Аналитический метод, численные методы: сеточные (МКР, МКЭ, МГЭ...) и бессеточный (метод точечных источников поля (МТИ)). Полуэмпирический метод, инженерные методы.
Раздел 9. Моделирование технологических процессов и материалов	Моделирование процессов масса- и теплопереноса. Моделирование свойств сплава в зависимости от состава и режимов термообработки.
Раздел 10. Оптимизация свойств материалов и процессов в материаловедении и металлургии	Классификация задач оптимизации. Виды оптимизации. Условия и критерии оптимальности в общей задаче оптимизации. Построение целевой функции, многокритериальные задачи оптимизации. Условная и безусловная оптимизация. Алгоритм построения математических моделей оптимизации. Методы оптимизации: исследование функции на экстремум, численный метод деления пополам, метод градиента, симплекс-метод, метод графов.
Раздел 11. Моделирование в условиях неопределенности	Модели с плохой организацией. Аналитико-имитационные модели. Элементы теории подобия и теории размерностей. Типы неопределенностей, методы их снятия: Метод экспертной оценки, метод интегральной свертки, построение векторного критерия.

Экзаменационная программа по дисциплине

«Моделирование и оптимизация свойств материалов и процессов»

(Перечень примерных вопросов для зачета)

1. Определение модели.
2. Определение объекта моделирования.

3. Определение гипотезы в моделировании.
4. Определение моделирования.
5. Обозначьте цели моделирования.
6. Принципы моделирования.
7. Физическое моделирование объектов: масштабное, аналоговое, натурное.
8. Физико-математические критерии подобия.
9. Понятие, определение, требование к математической модели.
10. Классификация математических моделей.
11. Цели математического моделирования для технических объектов и технологических процессов.
12. Алгоритм построения аналитической (теоретической) модели.
13. Алгоритм построения эмпирической (формально-статистической) модели.
14. Краткая характеристика основных этапов алгоритмов построения моделей.
15. Генеральная совокупность. Выборка, выборочный метод.
16. Основные числовые характеристики статистической выборки и выборочного распределения случайной величины.
17. Первичная математическая обработка экспериментальных данных (абсолютная и относительная погрешность оценки истинного значения, критерий Стьюдента, критерий Смирнова, критерий Фишера).
18. Приемы и методы вторичной математической обработки экспериментальных данных. Интерполяция (методы Лагранжа, Ньютона, сплайнов).
19. Интерполяция. Экстраполяция.
20. Аппроксимация, критерий аппроксимации, метод наименьших квадратов (МНК).
21. Основные виды статистического анализа экспериментальных данных: корреляционный анализ, дисперсионный анализ, регрессионный анализ.
22. Определение фактора, уровня фактора. Требования к фактору и к совокупности факторов.
23. Выбор уровней факторов. Выбор модели - вида функции отклика.
24. Матрица планирования эксперимента. Полный факторный эксперимент и математическая модель. Учет эффекта факторного взаимодействия. Дробный факторный эксперимент.
25. Проведение эксперимента. Ошибки параллельных опытов, проверка однородности дисперсий.
26. Определение коэффициентов регрессии на основе МНК, адекватность и точность регрессионных моделей. Виды регрессионных моделей.
27. Матричный подход к определению коэффициентов регрессии многофакторной модели. Оценка адекватности и точности многофакторной модели.
28. Уравнения математической физики и фундаментальные физические законы сохранения.

29. Уравнение теплопроводности, уравнение диффузии, уравнение состояния, уравнение неразрывности.
30. Начальные и граничные условия при построении теоретической модели. Основные методы решения задач.

**Варианты заданий для контрольной работы
по дисциплине «Моделирование и оптимизация свойств
материалов и процессов»**

Номер варианта студент определяет по последней цифре зачетной книжки.

Задание 1. Выборка, её числовые характеристики

Для указанных ниже статистических распределений выборок требуется:

- 1) Найти эмпирическую функцию распределения и построить ее график.
- 2) Построить полигон частот.
- 3) Вычислить выборочную среднюю.
- 4) Вычислить выборочную и исправленную дисперсии.

Вариант 1

x_i	1	4	8	10
n_i	5	3	2	1

Вариант 2.

x_i	-5	1	3	5
n_i	2	5	3	1

Вариант 3.

x_i	1	5	9	11
n_i	2	3	5	1

Вариант 4.

x_i	-2	1	2	3	4	5
n_i	2	1	2	2	2	1

Вариант 5.

x_i	0	1	2	3	4
n_i	5	2	1	1	1

Вариант 6.

x_i	1	5	6	8
n_i	5	15	20	10

Вариант 7.

x_i	1	5	7	9
n_i	6	12	1	1

Вариант 8.

x_i	2	3	5	6
n_i	10	15	5	20

Вариант 9.

x_i	-5	2	3	4
n_i	4	3	1	2

Вариант 10.

x_i	1	2	4	7
n_i	1	3	6	2

Задание 2. Линейная корреляция

По данным, приведенным ниже, вычислить коэффициент корреляции, найти выборочное уравнение прямой линии регрессии Y на X , построить корреляционное поле и нанести на него прямую регрессии Y на X .

Вариант 1.

X	5	9	10	12
Y	3	6	5	7

Вариант 2.

X	1	2	5	8	16
Y	1.0	1.4	2.2	2.8	4.0

Вариант 3.

X	1	3	4	7	10
Y	-1.0	-2.1	-2.4	-3.0	-3.3

Вариант 4.

X	2	5	7	10
Y	2	4	6	8

Вариант 5.

X	-1	-0.5	0	0.8	1.5
Y	2.7	3.2	4.0	6.5	11.0

Вариант 6.

X	-2	-1	0	1	2
Y	15.8	6.4	3.0	1.7	1.3

Вариант 7.

X	1	3	6	8	10
Y	8.9	5.6	3.5	2.7	2.0

Вариант 8.

X	1	3	6	10
Y	5.5	6.9	7.4	7.8

Вариант 9.

X	9.5	10.5	11.0	12.0	14.5
Y	4.5	6.0	8.5	9.0	10.0

Вариант 10.

X	6.6	7.0	8.0	9.0	9.8
Y	6.0	7.8	8.7	7.8	9.0

Задание 3. Расчет доверительной вероятности значения твердости изделий

На металлургическом заводе проведено контрольное определение твердости по Роквеллу рабочего слоя большой партии однотипных листопрокатных валков. Установлено, что твердость (случайная величина x) распределена нормально с математическим ожиданием M_x ед. по Роквеллу и средним квадратическим отклонением σ ед. по Роквеллу. Необходимо найти вероятность того, что значение твердости валков заключено в пределах $x_1 \dots x_2$ ед. по Роквеллу.

№ варианта	M_x	σ	x_1	x_2
1	59	5	56	63
2	58	5	55	62
3	60	4	56	64
4	61	5	57	64
5	59	4	56	62
6	58	4	55	61
7	60	3	57	63
8	61	3	58	65
9	59	3	55	64
10	58	3	54	60

Задание 4. Доверительные интервалы для параметров нормального закона распределения

Найти доверительный интервал для оценки математического ожидания a нормального распределения с надежностью $\gamma = 0,95$, зная выборочную среднюю \bar{x} , объем выборки n и среднее квадратичное отклонение σ .

Вариант 1.	$\bar{x} = 75,17;$	$n = 36;$	$\sigma = 6.$
Вариант 2.	$\bar{x} = 75,16;$	$n = 49;$	$\sigma = 7.$
Вариант 3.	$\bar{x} = 75,15;$	$n = 64;$	$\sigma = 8.$
Вариант 4.	$\bar{x} = 75,14;$	$n = 81;$	$\sigma = 9.$
Вариант 5.	$\bar{x} = 75,13;$	$n = 100;$	$\sigma = 10.$
Вариант 6.	$\bar{x} = 75,12;$	$n = 121;$	$\sigma = 11.$
Вариант 7.	$\bar{x} = 75,11;$	$n = 144;$	$\sigma = 12.$
Вариант 8.	$\bar{x} = 75,10;$	$n = 169;$	$\sigma = 13.$
Вариант 9.	$\bar{x} = 75,09;$	$n = 196;$	$\sigma = 14.$
Вариант 10.	$\bar{x} = 75,08;$	$n = 225;$	$\sigma = 15.$

Задание 5. Полный факторный эксперимент. Построение двухфакторной регрессионной математической модели.

Построить план полного факторного эксперимента 2^2 для нахождения зависимости глубины цементованного слоя Y (мм) в виде линейного уравнения регрессии от температуры T и времени t при протекании процесса газовой цементации изделия из низкоуглеродистой стали. Значение основных уровней управляющих факторов (температуры и времени) и интервалов варьирования значений факторов для разных вариантов заданий приведены в таблице:

Вариант, №	Фактор X_1 - Температура, $^{\circ}\text{C}$			Фактор X_2 - Время, час		
	Нулевой уровень, $X_1^0, (^{\circ}\text{C})$	Интервал варьирования $\Delta X_1, (^{\circ}\text{C})$	Область значений фактора	Нулевой уровень, $X_2^0, (\text{час})$	Интервал варьирования $\Delta X_2, (\text{час})$	Область значений фактора
1	875	25	850-900	6	2	4-8
2	925	25	900-950	6	2	4-8
3	975	25	950-1000	6	2	4-8
4	875	25	850-900	7	1	6-8

5	925	25	900-950	7	1	6-8
6	975	25	950-1000	7	1	6-8
7	875	25	850-900	8	1	7-9
8	925	25	900-950	8	1	7-9
9	975	25	950-1000	8	1	7-9
10	950	50	900-1000	6	2	4-8

Использовать результаты эксперимента из следующей таблицы:

Таблица 72

Глубина цементованного слоя при газовой цементации

Время выдержки в ч	Температура в °С							
	820	850	875	900	925	950	975	1000
	Глубина цементованного слоя в мм							
1	0,30	0,38	0,45	0,53	0,63	0,75	0,85	1,0
2	0,42	0,53	0,63	0,76	0,90	1,00	1,22	1,42
3	0,53	0,63	0,80	0,94	1,10	1,30	1,50	1,70
4	0,60	0,74	0,89	1,07	1,27	1,50	1,75	2,00
5	0,70	0,80	1,00	1,20	1,42	1,68	1,96	2,25
6	0,76	0,91	1,09	1,32	1,55	1,83	2,13	2,46
7	0,78	1,00	1,19	1,42	1,68	1,98	2,30	2,55
8	0,86	1,04	1,27	1,52	1,80	2,10	2,46	2,80
9	0,90	1,12	1,35	1,60	1,90	2,23	2,55	3,00
10	0,96	1,17	1,42	1,70	2,00	2,36	2,80	3,20
11	1,02	1,22	1,50	1,78	2,11	2,46	2,80	3,35

Образцы решения контрольных заданий

Задание 1. Выборка, её числовые характеристики

Дан закон распределения частот для дискретной случайной величины X в виде следующей таблицы

x_i	1	2	4	7
n_i	1	3	6	2

Требуется найти: 1) эмпирическую функцию распределения; 2) полигон частот; 3) выборочную среднюю; 4) выборочную дисперсию; 5) исправленную дисперсию.

Решение.

1) Объем выборки равен сумме частот: $n = \sum_{i=1}^4 n_i = 1 + 3 + 6 + 2 = 12$.

Эмпирическая функция $F = \frac{m(x)}{n}$, где $m(x)$ – суммарное число выборочных значений тех частот, аргументы которых удовлетворяет неравенству $x_i < x$.

Поэтому функция F равна:

$$\text{а) } F(1) = 0; \quad \text{б) } F(2) = \frac{1}{12}; \quad \text{в) } F(4) = \frac{1+3}{12} = \frac{1}{3}; \quad \text{г) } F(7) = \frac{1+3+6}{12} = \frac{5}{6};$$

$$\text{д) } F(x > 7) = 1.$$

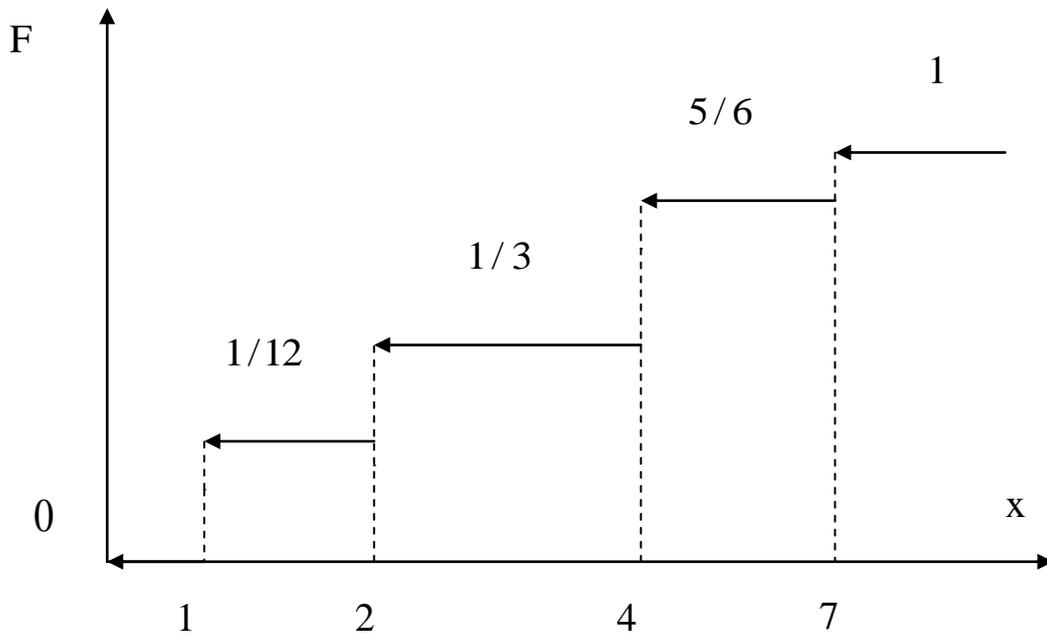


Рис.1 Эмпирическая функция распределения F.

2) Построим полигон частот по данному распределению выборки в виде ломаной линии

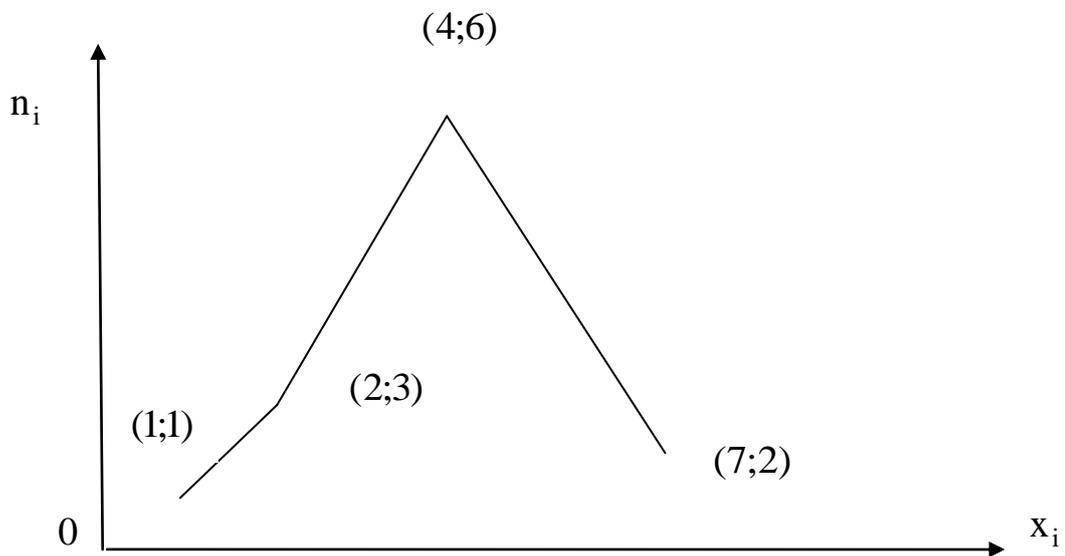


Рис. 2. Полигон частот

3) Найдем теперь выборочное среднее \bar{x} по следующей формуле

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k n_i x_i, \quad k \leq n.$$

В данном случае число групп данных $k = 4$, поэтому выборочное среднее равно

$$\bar{x} = \frac{1}{12} (1 \cdot 1 + 3 \cdot 2 + 6 \cdot 4 + 2 \cdot 7) = \frac{46}{12} \approx 4.$$

4) Найдем теперь выборочную дисперсию по следующей формуле

$$D_v = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{x})^2, \quad k \leq n.$$

Для упрощения вида числовых выкладок приближенно считаем, что $\bar{x} = 4$, поэтому

$$D_v = \frac{1}{12} (1 \cdot (1-4)^2 + 3 \cdot (2-4)^2 + 6 \cdot (4-4)^2 + 2 \cdot (7-4)^2) = \frac{57}{12} = 4,75.$$

5) Найдем теперь исправленную дисперсию по следующей формуле

$$D_i = \frac{1}{(n-1)} \sum_{i=1}^k n_i (x_i - \bar{x})^2, \quad k \leq n.$$

Выводим для $n-1 = 11$, что она равна

$$D_i = \frac{1}{11} (1 \cdot (1-4)^2 + 3 \cdot (2-4)^2 + 6 \cdot (4-4)^2 + 2 \cdot (7-4)^2) = \frac{57}{11} = 5,18.$$

Задание 2. Линейная корреляция

Дано корреляционное поле в виде таблицы

x	5	9	10	12
y	3	6	4	7

Вычислить коэффициент корреляции. Найти выборочное уравнение прямой регрессии Y на X , построить корреляционное поле и нанести на него линию прямой регрессии Y на X .

Решение. Определим выборочные средние значения для каждой случайной величины

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \frac{5+9+10+12}{4} = 9, \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i = \frac{3+6+4+7}{4} = 5.$$

Найдем теперь значения исправленных выборочных дисперсий для каждой случайной величины

$$S_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 = \frac{16+0+1+9}{3} = \frac{26}{3} = 8,67,$$

$$S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \frac{4+1+1+4}{3} = \frac{10}{3} = 3,33.$$

Исправленная эмпирическая ковариация и коэффициент корреляции равны величинам

$$S_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{(5-9)(3-5) + 0 + (10-9)(4-5) + (12-9)(7-5)}{3}$$

$$S_{xy} = \frac{13}{3}, \quad r = \frac{S_{xy}}{S_x S_y} = \frac{13}{\sqrt{260}} = \frac{13}{16,1} = 0,807.$$

Эмпирический коэффициент регрессии Y на X находится по формуле

$$b_{y|x} = \frac{S_{xy}}{S_x^2} = \frac{13}{26} = 0,5.$$

Уравнение прямой регрессии Y на X записывается в следующем виде

$$y = \bar{y} + b_{y|x} (x - \bar{x}), \quad y = 5 + 0,5(x - 9), \quad y = 0,5 + 0,5x.$$

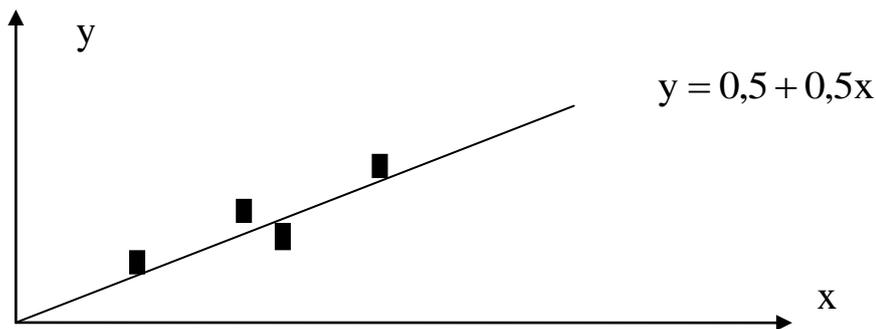


Рис.3 . Корреляционное поле и линия регрессии Y на X.

Задание 3. Расчет доверительной вероятности значения твердости изделий

На металлургическом заводе проведено контрольное определение твердости по Роквеллу рабочего слоя большой партии однотипных листопрокатных валков. Установлено, что твердость (случайная величина x) распределена нормально с математическим ожиданием 60 ед. по Роквеллу и средним квадратическим отклонением 5 ед. по Роквеллу. Необходимо найти вероятность того, что значение твердости валков заключено в пределах 57...65 ед. по Роквеллу.

Решение. Используем формулу вероятности

$$P(x_1 \leq x \leq x_2) = \Phi\left(\frac{x_2 - M_x}{\sigma}\right) - \Phi\left(\frac{x_1 - M_x}{\sigma}\right) \text{ или}$$

$P\{x_1 < x < x_2\} = \Phi(t_2) - \Phi(t_1)$, в соответствии с которой указанная вероятность сводится к разности нормальных функций Лапласа $\Phi(t)$. По условию задачи $x_1 = 57$; $x_2 = 65$; $M_x = 60$; $\sigma = 5$, следовательно,

$$\begin{aligned} P\{57 \leq x \leq 65\} &= \Phi\left(\frac{65 - 60}{5}\right) - \Phi\left(\frac{57 - 60}{5}\right) = \\ &= \Phi(1,0) - \Phi(-0,6) = \Phi(1,0) + \Phi(0,6). \end{aligned}$$

По таблице функции Лапласа из приложения находим:

$$\Phi(1,0) = 0,3413; \quad \Phi(0,6) = 0,2257.$$

Отсюда искомая вероятность

$$P\{57 \leq x \leq 65\} = \Phi(1,0) + \Phi(0,6) = 0,3413 + 0,2257 = 0,5670.$$

Задание 4. Доверительные интервалы для параметров нормального закона распределения

Найти с надежностью $\gamma = 0,99$ доверительный интервал оценки неизвестного математического ожидания a для нормально распределенного признака X , если даны значения: генеральное среднее квадратичное отклонение $\sigma = 4$; выборочное среднее $\bar{x} = 10,2$; объем выборки $n = 25$.

Решение. Неизвестное математическое ожидание находится в интервале

$$\bar{x} - \delta < a < \bar{x} + \delta, \quad \delta = t(\gamma) \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{n}}; \quad \Phi(t) = \frac{\gamma}{2}.$$

Последняя в записи формула обозначает уравнение относительно t , содержащее функцию Лапласа $\Phi(t)$:

$$\Phi(t) = 0,495 ,$$

Применяя таблицы функции Лапласа, находим неизвестное значение параметра $t = 2,60$. Определим величину δ

$$\delta = 2,60 \cdot \frac{4}{\sqrt{25}} \approx 2,08.$$

Найдем доверительный интервал

$$(10,2 - 2,08; 10,2 + 2,08) = (8,12; 12,28).$$

Доверительный интервал (8,12; 12,28) покрывает математическое ожидание a для нормально распределенной случайной величины с заданной величиной надежности $\gamma = 0,99$, которая называется также доверительной вероятностью. В данной задаче доверительная вероятность равна 0,99 или 99%.

Задание 5. Полный факторный эксперимент. Построение двухфакторной регрессионной математической модели.

Важным этапом планирования эксперимента является выбор математической модели объекта. Чаще используются полиномиальную модель, простым случаем является линейная модель. Достоинством является их универсальность линейность относительно параметров модели.

Например, если число факторов 2, то модель 2-го порядка может быть записана в виде

$$Y = a_0 + a_1 X_1 + a_2 X_2 + a_{12} X_1 X_2$$

Это модель линейного отклика параметров, учитывающая взаимодействие фактора x_1 и x_2 .

Конкретными условиями на основе априорных информации в области определения формулируется локальная подобласть планирования эксперимента.

Для этого необходимо: установить основной уровень и интервал варьирования, основной или нулевой уровень должен соответствовать наилучшим условиям, определенным из условия априорной информации этого исходная точка для построения планирования эксперимента, они находятся где-то в середине области определения. Построение плана эксперимента сводится к

выбору постоянных экспериментальных точек относительно нулевому уровню. Затем выбирают два предела верхний и нижний. В пределах этих уравнений будет варьироваться факты во время эксперимента.

Интервалом варьирования называют число прибавление, которого к основному уровню верхний уровень фактора, а вычитание нижний. Для упрощения записи эксперимента и обработки, данных масштабы факторов изменяют таким образом, чтобы верхнему уровню соответствует +1, а нижнему -1, основному 0.

Для факторов с непрерывной областью определения это можно сделать с помощью преобразования:

$$\tilde{X}_i = \frac{X_i - X_i^0}{I_i}$$

X_i - натуральное значение фактора;

X_i^0 - натуральное значение основного (нулевого) уровня;

$I_i = \Delta X_i$ - интервал варьирования фактора;

\tilde{X}_i - кодированное значение фактора.

Процесс преобразований с помощью этих формул называется кодированием данных. На интервале варьирования находятся ограничения, он не должен быть меньше погрешности измерения фактора. Верхний и нижний уровни должны быть в области определения.

Рассмотрим планирование двухфакторного эксперимента на примере простой и часто используемой линейной модели. В этом случае достаточно использовать только два уравнения фактора.

Если число факторов для проведения эксперимента требуется 2^k опытов $k \rightarrow 2^k$ условие эксперимента записываем в виде таблицы, где строка соответствует различным опытам, а столбец значениям факторов, также таблица называется матрицей планирования.

Построим матрицу планирования для 2-х факторов: $k = 2^2 = 4$.
ПЭФ 2^2

№ опыта	\tilde{X}_0	\tilde{X}_1	\tilde{X}_2	$\tilde{X}_1 \tilde{X}_2$	Y
1	1	1	1	1	Y₁
2	1	-1	1	-1	Y₂
3	1	1	-1	-1	Y₃
4	1	-1	-1	1	Y₄

Для нахождения коэффициентов линейной модели.

$$Y = a_0 + a_1 \tilde{X}_1 + a_2 \tilde{X}_2 + a_{12} \tilde{X}_1 \tilde{X}_2$$

используется формула

$$a_i = \frac{\sum_{j=1}^N \tilde{X}_{ij} \cdot Y_j}{N},$$

Где \tilde{X}_{ij} - кодированное значение фактора \tilde{X}_i в опыте с номером j ;

Y_j -- значение выходного фактора -- результат, полученный при проведении опыта с номером j . N - число опытов ($N = 4$).

Чтобы все коэффициенты вычислялись по одной формуле в матрицу планирования удобно ввести фактическую переменную \tilde{X}_0 , которые во всех опытах принимают значения $+1$. ($\tilde{X}_{0j} = +1$).

Таким образом, значения коэффициентов линейной модели имеют вид:

$$a_0 = \frac{1}{4}(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4);$$

$$a_1 = \frac{1}{4}(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4);$$

$$a_2 = \frac{1}{4}(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4);$$

$$a_{12} = \frac{1}{4}(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4).$$

Эффект $\tilde{X}_1 \tilde{X}_2$ называется эффектом парного взаимодействия или взаимодействием первого порядка.

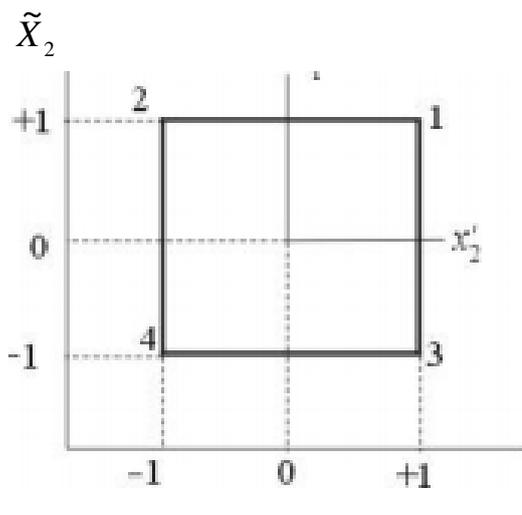


Рис.4. План полного факторного эксперимента ПФЭ 2^2

На рис.4 представлена область факторного пространства, для которой строится модель $Y = a_0 + a_1 \tilde{X}_1 + a_2 \tilde{X}_2 + a_{12} \tilde{X}_1 \tilde{X}_2$.

Поэтому данная область является областью существования модели.

Рассмотрим вариант № 11, условия определены таблицей

Вариант, №	Фактор X_1 - Температура, $^{\circ}\text{C}$			Фактор X_2 - Время, час		
	Нулевой уровень, $X_1^0, (^{\circ}\text{C})$	Интервал варьирования $\Delta X_1, (^{\circ}\text{C})$	Область значений фактора	Нулевой уровень, $X_2^0, (\text{час})$	Интервал варьирования $\Delta X_2, (\text{час})$	Область значений фактора
11	900	25	875-925	6	2	4-8

Используя формулу кодирования, определим верхний и нижний уровни для обоих факторов.

Для температуры:

$$\tilde{X}_1 = \frac{X_1 - X_1^0}{I_1} = \frac{X_1 - 900}{25} \Rightarrow \begin{cases} \tilde{X}_1^{\text{в}} = \frac{925 - 900}{25} = +1 \\ \tilde{X}_1^{\text{н}} = \frac{875 - 900}{25} = -1 \end{cases};$$

Для временного фактора

$$\tilde{X}_2 = \frac{X_2 - X_2^0}{I_2} = \frac{X_2 - 6}{2} \Rightarrow \begin{cases} \tilde{X}_2^{\text{в}} = \frac{8 - 6}{2} = +1 \\ \tilde{X}_2^{\text{н}} = \frac{4 - 6}{2} = -1 \end{cases}.$$

Построим матрицу планирования для 2-х факторов: $k = 2^2 = 4$. В столбец Y внесем значение глубины цементованного слоя (мм) из таблицы результатов эксперимента по газовой цементации:

- $Y_1 = 1.80$ (при температуре процесса 925°C и времени процесса 8 часов);
- $Y_2 = 1.27$ (при температуре процесса 875°C и времени процесса 8 часов);
- $Y_3 = 1.27$ (при температуре процесса 925°C и времени процесса 4 часа);
- $Y_4 = 0.89$ (при температуре процесса 875°C и времени процесса 4 часа).

Глубина цементованного слоя при газовой цементации

Время выдержки в ч	Температура в °С							
	820	850	875	900	925	950	975	1000
	Глубина цементированного слоя в мм							
1	0,30	0,38	0,45	0,53	0,63	0,75	0,85	1,0
2	0,42	0,53	0,63	0,76	0,90	1,00	1,22	1,42
3	0,53	0,63	0,80	0,94	1,10	1,30	1,50	1,70
4	0,60	0,74	0,89	1,07	1,27	1,50	1,75	2,00
5	0,70	0,80	1,00	1,20	1,42	1,68	1,96	2,25
6	0,76	0,91	1,09	1,32	1,55	1,83	2,13	2,46
7	0,78	1,00	1,19	1,42	1,68	1,98	2,30	2,55
8	0,86	1,04	1,27	1,52	1,80	2,10	2,46	2,80
9	0,90	1,12	1,35	1,60	1,90	2,23	2,55	3,00
10	0,96	1,17	1,42	1,70	2,00	2,36	2,80	3,20
11	1,02	1,22	1,50	1,78	2,11	2,46	2,80	3,35

ПЭФ 2²

№ опыта	\tilde{X}_0	\tilde{X}_1	\tilde{X}_2	$\tilde{X}_1 \tilde{X}_2$	Y
1	1	1	1	1	1.80
2	1	-1	1	-1	1.27
3	1	1	-1	-1	1.27
4	1	-1	-1	1	0.89

Вычислим значения коэффициентов линейной модели:

$$a_0 = \frac{1}{4}(Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4) = \frac{1}{4}(1.80 + 1.27 + 1.27 + 0.89) = 1.307 \cong 1.31;$$

$$a_1 = \frac{1}{4}(Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4) = \frac{1}{4}(1.80 - 1.27 + 1.27 - 0.89) = 0.227 \cong 0.23;$$

$$a_2 = \frac{1}{4}(Y_1 + Y_2 - Y_3 - Y_4) = \frac{1}{4}(1.80 + 1.27 - 1.27 - 0.89) = 0.227 \cong 0.23;$$

$$a_{12} = \frac{1}{4}(Y_1 - Y_2 - Y_3 + Y_4) = \frac{1}{4}(1.80 - 1.27 - 1.27 + 0.89) = 0.037 \cong 0.04.$$

Подставим в математическую модель полученные коэффициенты

$$Y = a_0 + a_1 \tilde{X}_1 + a_2 \tilde{X}_2 + a_{12} \tilde{X}_1 \tilde{X}_2$$

$$Y = 1.307 + 0.227 \cdot \tilde{X}_1 + 0.227 \cdot \tilde{X}_2 + 0.037 \cdot \tilde{X}_1 \cdot \tilde{X}_2.$$

Полученная математическая модель называется регрессионной, так как устанавливает аналитическую связь между эмпирически полученными случайными величинами.

Удобно работать с моделью, содержащей факторы не в кодированном выражении, а в натуральном. Сделаем в уравнение для Y подстановку:

$$\tilde{X}_1 = \frac{X_1 - 900}{25} = \frac{X_1}{25} - 36 \quad \text{и} \quad \tilde{X}_2 = \frac{X_2 - 6}{2} = \frac{X_2}{2} - 3$$

Получим

Проверим корректность полученной модели, сравнивая результаты аналитических вычислений с использованием модели с результатами эксперимента.

Рассмотрим значения факторов

$$\left. \begin{array}{l} X_1 = 875^\circ \text{C} \Leftrightarrow \tilde{X}_1 = -1 \\ X_2 = 4 \text{ часа} \Leftrightarrow \tilde{X}_2 = -1 \end{array} \right\} \Rightarrow Y = 1.307 + 0.227 \cdot (-1) + 0.227 \cdot (-1) + 0.037 \cdot (-1) \cdot (-1) = 0.89$$

Экспериментально полученный результат : $Y = 0.89$ мм глубина слоя.

Делаем вывод:

Модель корректна и адекватна. Ее можно использовать при разработке и проектировании процесса цементации стальных изделий.

Литература

№ пункта	Автор	Название	Издательство	Год издания	Вид издания	Кол-во в библиотеке	Адрес электронного ресурса	Вид доступа
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Зарубин В.С.	Математическое моделирование в технике	М.: МГТУ	2001 2003	учебник	37 10		
2	Саталки на Л.В., Пеньков В.Б.	Математическое моделирование [Электронный ресурс]	Липецк: Липецкий гос. техн. ун-т	2013	учебное пособие		http://www.iprbooks.hop.ru/22880.html	ЭБС
3	Шпаков П.С.	Математическая обработка результатов измерений	Красноярск: Сибирский федеральный ун-т	2014	учебное пособие		URL: //biblioclub.ru/index.php?page=book&id=435837	ЭБС
4	Щурин К.В.	Методика и практика планирования и организации эксперимента: практикум	Оренбург: Оренбургский гос. ун-т.	2012	учебное пособие		URL: //biblioclub.ru/index.php?page=book&id=260761	ЭБС
5	Никулин К.С.	Математическое моделирование в системе Mathcad : лабораторный практикум	М.: Изд-во МГТУ им. Баумана	2008	учебное пособие		http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=430749	ЭБС

Приложение I

Таблица I

Значение функции Лапласа $\Phi(t)$ – интеграла вероятностей

Интеграл вероятностей $\Phi(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^t e^{-t^2/2} dt, \quad \Phi(-t) = -\Phi(t)$

t	Сотые доли t									
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0,0	0,0000	0040	0080	0120	0160	0199	0239	0279	0319	0359
0,1	0398	0438	0478	0517	0557	0596	0636	0675	0714	0753
0,2	0793	0832	0871	0910	0948	0987	1026	1064	1103	1141
0,3	1179	1217	1255	1293	1331	1368	1406	1443	1480	1517
0,4	1554	1591	1628	1664	1700	1736	1772	1808	1844	1879
0,5	1915	1950	1985	2019	2054	2088	2123	2157	2190	2224
0,6	2257	2291	2324	2357	2389	2422	2454	2486	2517	2549
0,7	2580	2611	2642	2673	2703	2734	2764	2794	2823	2852
0,8	2881	2910	2939	2967	2995	3023	3051	3078	3106	3133
0,9	3159	3186	3212	3238	3264	3289	3315	3340	3365	3389
1,0	3413	3437	3461	3485	3508	3531	3554	3577	3599	3621
1,1	3643	3665	3686	3708	3729	3749	3770	3790	3810	3830
1,2	3849	3869	3888	3907	3925	3944	3962	3980	3997	4015
1,3	4032	4049	4066	4082	4099	4115	4131	4147	4162	4177
1,4	4192	4207	4222	4236	4251	4265	4279	4292	4306	4319
1,5	4332	4345	4357	4370	4382	4394	4406	4418	4429	4441
1,6	4452	4463	4474	4484	4495	4505	4515	4525	4535	4545
1,7	4554	4564	4573	4582	4591	4599	4608	4616	4625	4633
1,8	4641	4649	4656	4664	4671	4678	4686	4693	4699	4706
1,9	4713	4719	4726	4732	4738	4744	4750	4756	4761	4767
2,0	4772	4778	4783	4788	4793	4798	4803	4808	4812	4817
2,1	4821	4826	4830	4834	4838	4842	4846	4850	4854	4857
2,2	4861	4864	4868	4871	4875	4878	4881	4884	4887	4890
2,3	4893	4896	4898	4901	4904	4906	4909	4911	4913	4916
2,4	4918	4920	4922	4925	4927	4929	4931	4932	4934	4936

Таблица допускает линейную интерполяцию с ошибкой до 10^{-4} .

Пример. Вычислить $\Phi(1,614)$.

Решение. Берем из таблицы два значения $\Phi(1,61) = 0,4463$ и $\Phi(1,62) = 0,4474$ с разностью 0,0011 и вводим поправку на относительное приращение аргумента $(1,614 - 1,61)/0,01 = 0,4$:

$$\Phi(1,614) = \Phi(1,61) + 0,0011 \cdot 0,4 = 0,4467.$$

Продолжение таблицы для значений $t \geq 2,5$ см. в табл. II.

Таблица II (продолжение Таблицы I)

Значение функции Лапласа $\Phi(t)$ – интеграла вероятностей

Величины, связанные с интегралом вероятностей $\Phi(t)$;
 функция $t=t(\mathcal{P})$ является обратной для $\mathcal{P}=2\Phi(t)$

t	$\Phi(t)$	$1-2\Phi(t)$	$1-\mathcal{P}$	$t=t(\mathcal{P})$	\mathcal{P}
2,5	0,49379	0,01242	0,05	1,960	0,95
2,6	0,49534	0,00932	0,04	2,054	0,96
2,7	0,49653	0,00693	0,03	2,170	0,97
2,8	0,49744	0,00511	0,02	2,326	0,98
2,9	0,49813	0,00373	0,01	2,576	0,99
3,0	0,49865	0,00270	0,009	2,612	0,991
3,1	0,49903	0,00194	0,008	2,652	0,992
3,2	0,49931	0,00137	0,007	2,697	0,993
3,3	0,49952	0,00097	0,006	2,748	0,994
3,4	0,49966	0,00067	0,005	2,807	0,995
3,5	0,499767	0,000465	0,004	2,878	0,996
3,6	0,499841	0,000318	0,003	2,968	0,997
3,7	0,499892	0,000216	0,002	3,090	0,998
3,8	0,499927	0,000145	0,001	3,291	0,999
3,9	0,499952	0,000096	0,0009	3,320	0,9991
4,0	0,499968	0,000063	0,0008	3,353	0,9992
4,1	0,499979	0,000041	0,0007	3,390	0,9993
4,2	0,499987	0,000027	0,0006	3,432	0,9994
4,3	0,499991	0,000017	0,0005	3,481	0,9995
4,4	0,499995	0,000011	0,0004	3,540	0,9996
4,5	0,4999966	0,0000068	0,0003	3,615	0,9997
4,6	0,4999979	0,0000041	0,0002	3,720	0,9998
4,7	0,4999987	0,0000025	0,0001	3,891	0,9999
4,8	0,4999992	0,0000016	10^{-5}	4,417	$1-10^{-5}$
4,9	0,4999995	0,0000009	10^{-6}	4,892	$1-10^{-6}$
5,0	0,4999997	0,0000006	10^{-7}	5,327	$1-10^{-7}$

В таблице значений $\Phi(t)$ ошибка линейной интерполяции убывает с увеличением значений t ; она не превосходит:

10^{-4} —в интервале (2,5; 3,2); 10^{-5} —в интервале (3,2; 3,9);

10^{-6} —в интервале (3,9; 4,5); 10^{-7} —в интервале (4,5; 5,0).

В таблице значений $t(\mathcal{P})$ интерполяцию не производят.